



Рис. Структура излома циркониевой керамики с добавкой нанопорошка ZrO_2 (СЭМ)

В результате проведенных исследований стало ясно, что внедрение небольших добавок наномодификатора (до 5%) способно привести к увеличению прочности циркониевой керамики на 50%.

ФОНОННАЯ ИНЖЕНЕРИЯ ТЕПЛОПРОВОДЯЩИХ СВОЙСТВ АМОРФНЫХ КРЕМНИЕВЫХ НАНОНИТЕЙ

Крышмарь Д.В.^{*}, Ника Д.Л.

Молдавский государственный университет, г. Кишинёв, Республика Молдова

*E-mail: kryshmar@mail.ru

PHONON ENGINEERING OF THERMAL PROPERTIES OF AMORPHOUS SILICON NANOWIRES

Crismari D.V.^{*}, Nika D.L.

Moldova State University, Chisinau, Republic of Moldova

Research has been conducted to determine the quantum states of the vibrational motion of atoms in amorphous silicon nanowires. The effect of a strong drop in thermal conductivity is observed in such nanocompounds, explained by size quantization of the phonon spectrum due to a disordering of atomic bonds that form quasi-one-dimensional nanostructures. The investigated nanowires can be used as semiconductor thermoelectric cells to convert thermal energy into electrical energy.

Среди перспективных направлений исследований в современной физике важную роль играет изучение аморфных наноструктур [1]. Эффект падения решёточной теплопроводности в таких соединениях может быть использован в

термоэлектрических применениях [2]. Аморфному состоянию вещества в целом свойственна атомарная структура, имеющая ближний порядок, а характерный для кристаллических структур дальний порядок отсутствует [3]. Один из самых доступных материалов, аморфный кремний является некристаллической аллотропной формой кремния [4] и может существовать, например, в форме нанонитей, предлагая ряд уникальных возможностей для разнообразных применений в электронике и фофонике.

В представленной работе аморфизация кристаллических квазиодномерных соединений достигалась за счёт вариации параметров межатомных взаимодействий, входящих в valence force field модель колебаний кристаллической решётки [5]. При расчёте энергетического спектра аморфных нанонитей были учтены следующие механизмы межатомных взаимодействий: двухчастичные stretching, трёхчастичные bending, stretching-stretching, stretching-bending и четырёхчастичные bending-bending. В исследуемых квазиодномерных наноструктурах растёт число малоскоростных квантов колебательного движения атомов, что ведёт к подавлению фононного транспорта: теплопроводность в кремниевой нанонити квадратного поперечного сечения с размером, например, 8x8 монослоёв, рассчитанная при комнатной температуре, падает с примерно 4.5 Вт/м·К для нанонити из кристаллического кремния до 2.8 Вт/м·К для аморфной нанонити со случайным разбросом значений параметров межатомных взаимодействий.

Размерное квантование фононного спектра за счёт разупорядочения атомных связей вызывает существенную перестройку плотностей фононных состояний и эффект сильного падения теплопроводности в кремниевых аморфных нанонитях, что может быть использовано при создании термоэлектрических элементов. Управление степенью аморфизирования наносоединений позволяет устанавливать контроль над регулированием модифицирования фононных свойств рассматриваемых квазиодномерных наноструктур. Т.о. представленное в работе направление исследований выглядит перспективным с точки зрения теоретического отбора нанометровых структур с подходящими тепловыми и электрическими свойствами для дальнейшего их внедрения в нанотехнологические устройства.

Благодарность: за финансовую поддержку проведённых исследований авторы выражают благодарность научным проектам Республики Молдова 15.817.02.29F и ASM-STCU-5937.

1. Zorn R., Phys. Rev. B, 81, 054208 (2010).
2. Wada H., Kamijoh T., Jpn. J. Appl. Phys., 35, L648 (1996).
3. Inoue A., Hashimoto K., Advances in Material Research: Amorphous and Nanocrystalline Materials, Springer (2001).
4. Zallen R., The Physics of Amorphous Solids, Wiley InterScience (1998).
5. Camacho D., Niquet Y.M., Physica E, 42, 1361 (2010).